Análise Discriminante Múltipla

Felipe N. S. Bezerra

10 de dezembro de 2018

Table of Contents

Avaliação - Estatística Multivariada IV Análise Discriminante Múltipla

Considere o conjunto Auto data do pacote ISLR do software R para desenvolver um modelo de predição para prever se um carro tem alta ou baixa quilometragem.

```
library(ISLR)
library(foreign)
library(MASS)
library(dplyr)
##
## Attaching package: 'dplyr'
## The following object is masked from 'package:MASS':
##
##
       select
## The following objects are masked from 'package:stats':
##
       filter, lag
##
## The following objects are masked from 'package:base':
##
##
       intersect, setdiff, setequal, union
library(biotools)
## Loading required package: rpanel
## Loading required package: tcltk
## Package `rpanel', version 1.1-4: type help(rpanel) for summary
information
## Loading required package: tkrplot
## Loading required package: lattice
## Loading required package: SpatialEpi
## Loading required package: sp
```

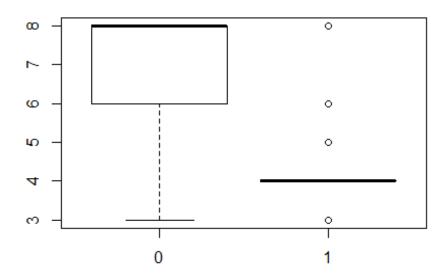
```
## ---
## biotools version 3.1
##
library(DiscriMiner)
library(ggplot2)
library(mvnormtest)
summary(Auto)
##
                      cylinders
                                    displacement
                                                     horsepower
        mpg
   Min. : 9.00
                                                   Min. : 46.0
##
                   Min. :3.000
                                   Min. : 68.0
   1st Qu.:17.00
                   1st Qu.:4.000
                                   1st Qu.:105.0
                                                   1st Qu.: 75.0
## Median :22.75
                   Median :4.000
                                   Median :151.0
                                                   Median: 93.5
   Mean :23.45
                   Mean :5.472
                                   Mean :194.4
##
                                                   Mean
                                                          :104.5
   3rd Qu.:29.00 3rd Qu.:8.000
                                   3rd Qu.:275.8
                                                   3rd Qu.:126.0
##
   Max.
          :46.60
                   Max. :8.000
                                   Max.
                                          :455.0
                                                   Max.
                                                          :230.0
##
##
        weight
                   acceleration
                                                       origin
                                       year
##
           :1613
                  Min. : 8.00
                                         :70.00
                                                         :1.000
   Min.
                                  Min.
                                                  Min.
   1st Qu.:2225
                  1st Qu.:13.78
                                  1st Qu.:73.00
                                                  1st Qu.:1.000
##
##
   Median :2804
                  Median :15.50
                                  Median :76.00
                                                  Median :1.000
##
   Mean :2978
                  Mean :15.54
                                  Mean :75.98
                                                  Mean :1.577
##
   3rd Qu.:3615
                   3rd Qu.:17.02
                                  3rd Ou.:79.00
                                                   3rd Ou.:2.000
##
   Max. :5140
                  Max. :24.80
                                  Max. :82.00
                                                  Max. :3.000
##
##
                    name
##
   amc matador
                        5
   ford pinto
                        5
##
## toyota corolla
                        5
## amc gremlin
                        4
##
  amc hornet
##
    chevrolet chevette:
    (Other)
(a) Crie uma variável binária, classmpg, que seja igual a 1 se o mpg for
maior do que a mediana e 0, caso contrário. Você pode calcular a mediana
de mpg no R usando a função median(). Note que talvez seja mais fácil
usar o comando data.frame() para criar um conjunto de dados que contenha
o classmpg e as demais variáveis do Auto data.
avaldata <- Auto[,-1]
avaldata <- avaldata[,-8]
avaldata$origin <- as.factor(avaldata$origin)</pre>
scaleavaldata <- avaldata[,-7]</pre>
scaleavaldata <- as.data.frame(scale(scaleavaldata))</pre>
classmpg <- as.numeric(Auto$mpg>median(Auto$mpg))
avaldata$classmpg <- as.factor(classmpg)</pre>
```

```
scaleavaldata$origin <- avaldata$origin
scaleavaldata$classmpg <- avaldata$classmpg</pre>
```

(b) Explore os dados graficamente para investigar a associação entre o classmpg e as demais variáveis. Quais variáveis parecem ser úteis para prever o classmpg? Pode usar boxplots para responder a essa questão.

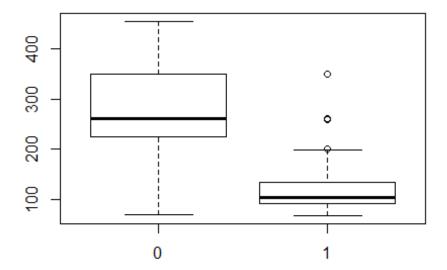
boxplot(avaldata\$cylinders ~ avaldata\$classmpg, main='Cilindros')

Cilindros



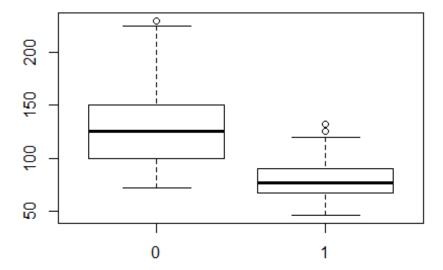
boxplot(avaldata\$displacement ~ avaldata\$classmpg, main='Deslocamento do
Motor')

Deslocamento do Motor



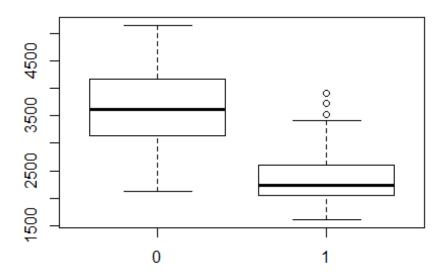
boxplot(avaldata\$horsepower ~ avaldata\$classmpg, main='Potência')

Potência



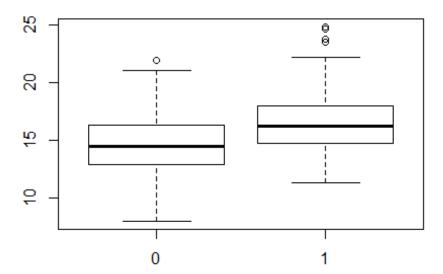
boxplot(avaldata\$weight ~ avaldata\$classmpg, main='Peso')



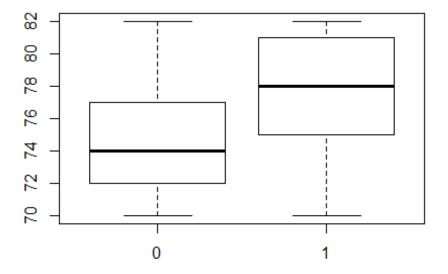


boxplot(avaldata\$acceleration ~ avaldata\$classmpg, main='Aceleração')

Aceleração







```
aggregate(avaldata[,1:6], list(avaldata$classmpg), quantile)
##
     Group.1 cylinders.0% cylinders.25% cylinders.50% cylinders.75%
## 1
           0
                                                                      8
                         3
                                        6
## 2
           1
                         3
                                        4
                                                       4
                                                                      4
##
     cylinders.100% displacement.0% displacement.25% displacement.50%
## 1
                   8
                                   70
                                                    225
                                                                       261
## 2
                   8
                                   68
                                                     91
                                                                      105
     displacement.75% displacement.100% horsepower.0% horsepower.25%
##
## 1
                   350
                                      455
                                                    72.0
                                                                   100.0
## 2
                   134
                                      350
                                                    46.0
                                                                    67.0
##
     horsepower.50% horsepower.75% horsepower.100% weight.0% weight.25%
## 1
               125.0
                               150.0
                                                230.0
                                                         2124.00
                                                                    3139.75
                                                132.0
## 2
                76.5
                                90.0
                                                         1613.00
                                                                    2045.00
##
     weight.50% weight.75% weight.100% acceleration.0% acceleration.25%
## 1
        3607.00
                    4156.75
                                 5140.00
                                                    8.000
                                                                     12.950
## 2
        2229.00
                    2607.50
                                 3900.00
                                                   11.300
                                                                     14.700
##
     acceleration.50% acceleration.75% acceleration.100% year.0% year.25%
## 1
                14.500
                                  16.250
                                                     21.900
                                                                  70
                                                                            72
                                                                  70
## 2
                16.200
                                  17.925
                                                     24.800
                                                                            75
     year.50% year.75% year.100%
##
## 1
           74
                     77
                                82
## 2
           78
                     81
                                82
```

As variáveis "Cilindros" e "Deslocamento do Motor" parecem possuir maior acertividade em definir os veículos com maior consumo de combustível (classmpg = 0). Veículos com um número de cilindros diferente de 4 e Deslocamento do Motor com

mais de 200 in percorrem menos milhas por galão; as demais faixas destas variáveis apresentam consumo de combustível variado. Veículos com maior potência, menor aceleração, mais pesados e mais antigos aparentam consumir mais combustível, mas tendência não se mostra tão definida quanto as duas variáveis citadas anteriormente.

```
(c) Divida os dados em duas amostras, uma de treino (75%) e outra de
teste (25%).

set.seed(8)
treinoaval <- scaleavaldata[sample(nrow(scaleavaldata), size =
nrow(scaleavaldata) * 0.75),]
testeaval <- scaleavaldata[-sample(nrow(scaleavaldata), size =
nrow(scaleavaldata) * 0.75),]</pre>
```

(d) Obtenha e interprete as funções discriminantes para esse estudo. Verifique também as suposições da análise. Você utilizaria a análise discriminante linear ou quadrática para classificação?

Verificação do tamanho da amostra:

```
table(scaleavaldata$classmpg)

##

## 0 1

## 196 196

table(treinoaval$classmpg)

##

## 0 1

## 146 148

table(testeaval$classmpg)

##

## 0 1

## 50 48
```

Todos os grupos possuem mais de 20 observações (número aceitável para 6 variáveis independentes), inclusive nas amostras separadas para treino e teste.

Verificação de multicolinearidade:

```
cor(scaleavaldata[,1:6])

## cylinders displacement horsepower weight
acceleration
## cylinders 1.0000000 0.9508233 0.8429834 0.8975273 -
0.5046834
```

```
## displacement 0.9508233
                              1.0000000 0.8972570 0.9329944
0.5438005
## horsepower
                 0.8429834
                              0.8972570 1.0000000 0.8645377
0.6891955
                 0.8975273
                              0.9329944 0.8645377 1.0000000
## weight
0.4168392
## acceleration -0.5046834
                             -0.5438005 -0.6891955 -0.4168392
1.0000000
                -0.3456474
                             -0.3698552 -0.4163615 -0.3091199
## year
0.2903161
##
                      year
## cylinders
                -0.3456474
## displacement -0.3698552
## horsepower
               -0.4163615
## weight
                -0.3091199
## acceleration 0.2903161
                 1.0000000
## year
```

As variáveis "Cilindros" e "Deslocamento do Motor" estão altamente correlacionadas (correlação superior a 0,95). Utilizar ambas implica em redundância, então apenas uma (Deslocamento do Motor) será utilizada no ajuste do modelo.

Normalidade multivariada das variáveis independentes:

```
mshapiro.test(t(scaleavaldata[,1:6]))
##
    Shapiro-Wilk normality test
##
##
## data: Z
## W = 0.86677, p-value < 2.2e-16
shapiro.test(scaleavaldata$cylinders)
##
##
   Shapiro-Wilk normality test
##
## data: scaleavaldata$cylinders
## W = 0.75066, p-value < 2.2e-16
shapiro.test(scaleavaldata$displacement)
##
##
   Shapiro-Wilk normality test
##
## data: scaleavaldata$displacement
## W = 0.88184, p-value < 2.2e-16
shapiro.test(scaleavaldata$horsepower)
##
## Shapiro-Wilk normality test
```

```
##
## data: scaleavaldata$horsepower
## W = 0.9041, p-value = 5.022e-15
shapiro.test(scaleavaldata$weight)
##
##
   Shapiro-Wilk normality test
##
## data: scaleavaldata$weight
## W = 0.94147, p-value = 2.602e-11
shapiro.test(scaleavaldata$acceleration)
##
   Shapiro-Wilk normality test
##
##
## data: scaleavaldata$acceleration
## W = 0.99187, p-value = 0.03053
shapiro.test(scaleavaldata$year)
##
##
   Shapiro-Wilk normality test
          scaleavaldata$year
## data:
## W = 0.94697, p-value = 1.223e-10
```

Segundo o teste de Shapiro-Wilk, nenhuma das variáveis independentes segue distribuição normal e, consequentemente, a amostra não obedece ao pressuposto de normalidade multivariada, requerido para que se prossiga com a análise discriminante.

Homogeneidade de variância/covariância:

```
boxM(data = scaleavaldata[,1:6], grouping = scaleavaldata$classmpg)

##

## Box's M-test for Homogeneity of Covariance Matrices

##

## data: scaleavaldata[, 1:6]

## Chi-Sq (approx.) = 404.08, df = 21, p-value < 2.2e-16</pre>
```

Não há igualdade entre as matrizes de variâncias e covariâncias da amostra, mesmo considerando aceitável um p-valor de 0,01 (mais comum para este teste).

Seleção de variável:

```
## horsepower 0.4354455 0.5645545 225.22203 0.0000000e+00 ## weight 0.5725786 0.4274214 391.16648 0.000000e+00 ## acceleration 0.1017403 0.8982597 33.07302 2.236779e-08 ## year 0.1996819 0.8003181 72.85494 7.771561e-16
```

Todas as variáveis contribuem significativamente para a discriminação dos grupos (embora com menor relevância se tratando da "Aceleração" e do "Ano do Modelo").

Determinação da função discriminante:

Coeficientes das funções discriminantes:

```
discrim_aval$discrivar

## DF1

## constant -0.004868575

## displacement -0.606862514

## horsepower 0.467179185

## weight -1.262871937

## acceleration 0.033320876

## year 0.477663363
```

Como há apenas dois grupos, só é necessária uma função discriminante.

```
DF
= -0.005 - 0.607 * displacement + 0.467 * horsepower - 1.263 * weight + 0.033 * acceleration + 0.478 * year
```

Autovalores das funções discriminantes e variabilidade explicada:

```
discrim_aval$values

## value proportion accumulated
## DF1 1.699744 100 100
```

Como só há uma função discriminante, toda a variância do modelo é explicada por ela.

Matriz de fatores (correlação entre as variáveis explicativas e a função discriminante):

```
discrim_aval$discor

## DF1

## displacement -0.9342946

## horsepower -0.8316493

## weight -0.9536540

## acceleration 0.4019941

## year 0.5631741
```

A função discriminante obtida é mais fortemente ponderada pelo "Peso do Veídulo" e pelo "Deslocamento do motor", e menos pela "Aceleração" e pelo "Ano do Modelo".

Significância da função discriminante

Dado o baixo p-valor, a função é considerada significante.

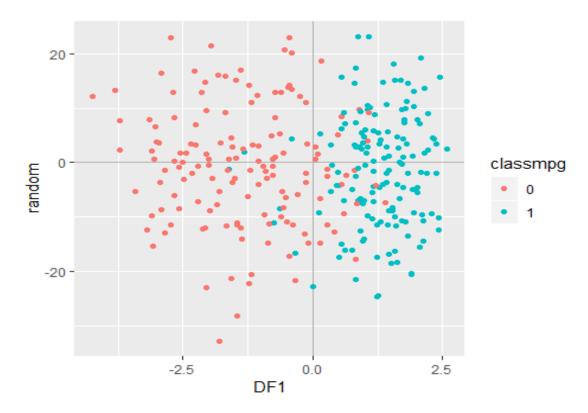
Centróide:

A função discriminante é desenvolvida de modo a tornar os valores do grupo dos veículos com maior consumo de combustível (classmpg = 0) negativos e do grupo dos veículos com menor consumo (classmpg = 1) positivos; isso fica explícito pelos valores discriminantes dos centróides de cada grupo

Scatterplot

```
treinoaval$random <- rnorm(294,mean=0,sd=10)

library(ggplot2)
ggplot(data = treinoaval, aes(x = DF1, y = random, colour = classmpg)) +
    geom_hline(yintercept = 0, colour="gray70") +
    geom_vline(xintercept = 0, colour="gray70") +
    geom_point()</pre>
```



A variável na ordenada é composta de números aleatórios, apenas para que seja mais claro visualizar a distribuição das observações ao longo do eixo dos valores discriminantes.

Como as matrizes de variâncias e covariâncias foram diferentes, é preferível que se utilize a análise discriminante quadrática, que, ao contrário da linear, não tem a igualdade das variâncias como um pressuposto.

(e) Compare a LDA e a QDA com relação à taxa de erro.

Análise Discriminante Linear

```
acurlda <- (tablda[1,1] + tablda[2,2])/sum(tablda)
acurlda
## [1] 0.8571429</pre>
```

Análise Discriminante Quadrática

```
fitqda <- quaDA(variables = treinoaval[, c("displacement", "horsepower",</pre>
"weight", "acceleration", "year")],
              group = treinoaval$classmpg)
classidqda <- classify(fitqda, newdata = testeaval[, c("displacement",</pre>
"horsepower", "weight", "acceleration", "year")])$pred_class
tabqda <- table(classidqda, testeaval$classmpg)</pre>
tabqda
##
## classidqda 0 1
##
            0 42 6
##
            1 8 42
acurqda <- (tabqda[1,1] + tabqda[2,2])/sum(tabqda)</pre>
acurada
## [1] 0.8571429
```

Embora ambas as formas de análise, linear e quadrática, obtiveram a mesma taxa de acerto, a análise linear classificou mais veículos (e, com isso, teve tanto mais acertos quanto mais erros) como pertencentes ao grupo 1, dos veículos com menor consumo de combustivel por distância percorrida.

```
(f) Faça uma regressão logística e avalie sua taxa de erro de acordo com
alguma regra de classificação.
treinoaval$classmpg <- as.numeric(treinoaval$classmpg) -1</pre>
testeaval$classmpg <- as.numeric(testeaval$classmpg) -1</pre>
fitlgr <- glm(classmpg ~ cylinders + displacement + horsepower + weight +
acceleration + year,
                      family = binomial(link = 'logit'), data =
treinoaval)
fitlgr
##
## Call: glm(formula = classmpg ~ cylinders + displacement + horsepower
##
       weight + acceleration + year, family = binomial(link = "logit"),
##
       data = treinoaval)
##
## Coefficients:
```

```
##
    (Intercept)
                     cylinders displacement
                                                 horsepower
                                                                    weight
##
        -1.0372
                       -0.1117
                                       0.0140
                                                    -1.0437
                                                                   -4.2250
## acceleration
                          year
         0.2057
                        1.7309
##
##
## Degrees of Freedom: 293 Total (i.e. Null); 287 Residual
## Null Deviance:
                         407.6
## Residual Deviance: 117.9
                                 AIC: 131.9
p <- mean(treinoaval$classmpg)</pre>
## [1] 0.5034014
log_chances <- predict.glm(fitlgr, newdata = testeaval[,1:6])</pre>
prob_posteriori <- exp(log_chances)/(1+exp(log_chances))</pre>
prob_posteriori
                                                                    20
##
                            6
                                                      16
## 4.256488e-04 1.109317e-06 3.525055e-07 5.175486e-02 9.796627e-01
             23
                           26
                                         30
                                                      34
## 4.103425e-01 2.390383e-07 7.843469e-01 1.460671e-01 7.904104e-03
                                         64
             40
                           48
                                                      66
                                                                    71
## 2.000467e-06 7.864827e-03 4.920782e-06 3.416848e-05 2.829175e-06
                           79
                                         81
##
             72
                                                      83
## 6.246914e-01 1.131481e-01 6.484706e-01 4.133476e-01 2.431765e-07
             99
                          102
                                        103
                                                     114
## 2.522955e-02 1.401101e-01 9.914192e-01 4.636109e-01 2.504000e-06
##
            120
                          122
                                        124
                                                     126
                                                                   130
## 4.666267e-01 1.916331e-03 9.483533e-02 9.177989e-02 9.889975e-01
            132
                          135
                                        140
                                                     143
                                                                   148
## 9.948718e-01 5.403969e-03 1.229081e-05 9.848276e-01 9.621781e-01
##
            153
                          158
                                        160
                                                     162
## 6.527269e-02 3.985728e-05 1.203096e-05 2.754726e-03 6.499481e-03
                          174
                                        176
                                                     180
## 2.581886e-01 7.411023e-01 9.898541e-01 2.402838e-01 4.197662e-01
                                        193
                                                     194
                                                                   197
            185
                          191
## 7.972359e-01 1.476874e-04 4.679183e-02 3.910688e-01 9.918156e-01
            198
                          202
                                        204
                                                     206
                                                                   210
## 9.937274e-01 1.125765e-02 9.957097e-01 9.821947e-01 1.861601e-01
            217
                          218
                                        237
                                                     242
## 9.953849e-01 9.856165e-01 7.459566e-01 5.829211e-01 6.382601e-01
                                        249
##
## 9.990002e-01 9.986951e-01 9.991933e-01 1.067969e-01 3.191861e-01
            259
                          260
                                        276
                                                     281
                                                                   282
## 1.077128e-01 5.082163e-01 1.630177e-01 2.185866e-01 7.335051e-01
                                                     294
##
            284
                          290
                                        293
                                                                   296
## 3.806778e-01 3.168307e-04 2.541490e-03 9.984874e-01 9.982196e-01
            297
                          298
                                        301
                                                     302
## 9.322352e-01 2.223958e-01 2.522532e-01 9.939049e-01 9.419837e-01
                          321
                                        322
            317
                                                     324
```

```
## 3.641363e-01 9.809160e-01 9.948039e-01 8.490122e-01 9.993669e-01
##
                                         345
             329
                           334
                                                        351
                                                                      353
## 7.444493e-01 5.236528e-01 9.996807e-01 9.981223e-01 9.970773e-01
             361
                           363
                                         367
                                                        373
                                                                      374
##
## 8.096391e-01 7.244041e-01 3.713607e-01 9.750190e-01 9.449422e-01
##
             383
                           387
                                         394
## 9.996243e-01 9.017276e-01 9.997223e-01
classiflgr <- ifelse(prob posteriori > p, 1, 0)
classiflgr
##
     4
                 16
                     20
                          23
                              26
                                  30
                                       34
                                           38
                                                40
                                                    48
                                                        64
                                                             66
                                                                 71
                                                                     72
                                                                          79
81
##
     0
          0
              0
                  0
                       1
                           0
                               0
                                    1
                                        0
                                             0
                                                 0
                                                     0
                                                          0
                                                              0
                                                                  0
                                                                       1
                                                                           0
1
             99 102 103 114 117 120 122 124 126 130 132 135 140 143 148
##
        91
    83
153
##
     0
          0
                               0
                                    0
                                        0
                                                 0
## 158 160 162 164 170 174 176 180 181 185 191 193 194 197 198 202 204
206
##
     0
         0
              0
                  0
                       0
                           1
                               1
                                    0
                                        0
                                             1
                                                 0
                                                     0
                                                          0
                                                              1
                                                                  1
                                                                       0
                                                                           1
1
## 210 217 218 237 242 244 245 247 249 257 258 259 260 276 281 282 284
290
##
                           1
                               1
                                    1
                                        1
          1
              1
                  1
                       1
## 293 294 296 297 298 301 302 309 317 321 322 324 326 329 334 345 351
353
                           0
                               1
                                    1
                                        0
##
     0
          1
              1
                  1
                       0
                                             1
                                                 1
                                                     1
                                                          1
                                                              1
                                                                  1
                                                                       1
                                                                           1
## 361 363 367 373 374 383 387 394
##
     1
         1
              0
                  1
                       1
                           1
                               1
tablgr <- table(classiflgr, testeaval$classmpg)</pre>
tablgr
##
## classiflgr
               0
##
             0 44
                  7
             1 6 41
##
acurlrg <- (tablgr[1,1] + tablgr[2,2])/sum(tablgr)</pre>
acurlrg
## [1] 0.8673469
treinoaval$classmpg <- as.factor(treinoaval$classmpg)</pre>
testeaval$classmpg <- as.factor(testeaval$classmpg)</pre>
```

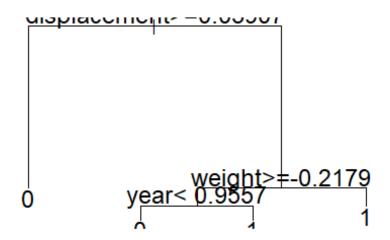
A regra de classificação considerou a própria probabilidade *a priori* de um veículo pertencer a determinado grupo. Veículos que tiveram uma probabilidade de pertencer

ao grupo 1, segundo a regressão logística, maior que a proporção de veículos do grupo 1, foram classificados em tal grupo.

A taxa de acerto, neste caso, foi maior que o obtido da análise discriminante.

```
(g) Faça agora uma árvore de decisão e avalie sua taxa de erro.
set.seed(0)
library(rpart)
fitdtr <- rpart(classmpg ~ cylinders + displacement + horsepower + weight
+ acceleration + year + origin,
           method="class", data = treinoaval)
fitdtr
## n= 294
##
## node), split, n, loss, yval, (yprob)
        * denotes terminal node
##
##
   1) root 294 146 1 (0.496598639 0.503401361)
     ##
     3) displacement< 0.03906588 168 25 1 (0.148809524 0.851190476)
##
##
       6) weight>=-0.2178993 29 14 0 (0.517241379 0.482758621)
       12) year< 0.9556623 19 4 0 (0.789473684 0.210526316) *
##
##
        13) year>=0.9556623 10
                             0 1 (0.000000000 1.000000000) *
##
       7) weight< -0.2178993 139 10 1 (0.071942446 0.928057554)
       14) year< -0.6731187 31
                              9 1 (0.290322581 0.709677419)
##
##
         28) weight>=-0.7070666 9 3 0 (0.666666667 0.333333333) *
         29) weight< -0.7070666 22 3 1 (0.136363636 0.863636364) *
##
        melhorCp = fitdtr$cptable[which.min(fitdtr$cptable[,"xerror"]),"CP"]
melhorCp
## [1] 0.01027397
pfit <- prune(fitdtr, cp = melhorCp)</pre>
pfit
## n= 294
## node), split, n, loss, yval, (yprob)
        * denotes terminal node
##
##
   1) root 294 146 1 (0.49659864 0.50340136)
##
     ##
     3) displacement< 0.03906588 168 25 1 (0.14880952 0.85119048)
##
##
       6) weight>=-0.2178993 29 14 0 (0.51724138 0.48275862)
       12) year< 0.9556623 19 4 0 (0.78947368 0.21052632) *
##
```

```
## 13) year>=0.9556623 10 0 1 (0.00000000 1.00000000) *
## 7) weight< -0.2178993 139 10 1 (0.07194245 0.92805755) *
plot(pfit)
text(pfit,use.n=FALSE,all=FALSE,cex=1.5)</pre>
```



```
classifdtr <- predict(pfit, testeaval[,1:7], type = 'class')
tabdtr <- table(classifdtr, testeaval$classmpg)
tabdtr

##
## classifdtr 0 1
## 0 45 5
## 1 5 43
acurdtr <- (tabdtr[1,1] + tabdtr[2,2])/sum(tabdtr)
acurdtr
## [1] 0.8979592</pre>
```

Este método de classificação obteve a maior taxa de acerto, embora não tão distante dos demais métodos.

⁽h) Utilize o método dos vizinhos mais próximos com k = 30 e avalie sua taxa de erro.

o método de "k vizinhos mais próximos" obteve exatamente a mesma taxa de acerto das análises discriminantes linear e quadrática. Entretanto, tendendo a classificar mais observações como pertencentes à classe 1, mas não tanto quanto a LDA.